

Sveiki visi senieji ir naujieji dalyviai,

Kiekviena olimpiada – nauja galimybė. Galimybė tobulėti, išmokti kažko naujo, susirasti bendraminčių... ir, žinoma, laimėti. Mes stengėmės, kad NLitChO būtų būtent tokia, kaip mums pavyko, spręsite Jūs.

Šiometinė olimpiada turi vieną išskirtinį bruožą – NLitChO yra nuotolinė ne tik dalyviams, bet ir užduočių autoriams. Keletas buvusių dalyvių, išvykusių studijuoti į užsienį, prisijungė prie mūsų.

Tikimės, kad ir šį olimpiadų sezoną Jus lydės sėkmė. Laukiame visų Jūsų ar bent jau didžiosios daugumos atvykstant į LitChO'45. Bet visų pirma, sėkmės ir kantrybės sprendžiant NLitChO užduotis!

NLitChO koordinatorius
Raimondas GALVELIS

Olimpiados komisijos nariai (užduočių autoriai):

- **Martynas SKAPAS**, Vilniaus Universitetas, chemija, 1 kursas;
- **Gytis JANKEVIČIUS**, International University Bremen, biochemija ir ląstelių biologija, 1 kursas;
- **Marius JURGELĖNAS**, Vilniaus Universitetas, chemija, 1 kursas;
- **Mantas LIUTKUS**, The University of Nottingham, biochemija ir biologinė chemija, 1 kursas;
- **Virginija JOVAIŠAITĖ**, Vilniaus Universitetas, biochemija, 2 kursas;
- **Rimantas ŠLĖGERIS**, Vilniaus Universitetas, biochemija, 2 kursas;
- **Deimantė ŠIMAITĖ**, Vilniaus Universitetas, biochemija, 3 kursas;
- **Petras KRUOPYS**, Vilniaus Universitetas, chemija, 3 kursas;
- **Raimondas GALVELIS**, Vilniaus Universitetas, chemija, 3 kursas.

Už pagalbą ruošiant užduotis esame dėkingi:

- **doc. dr. Rimantui RAUDONIUI;**
- **Pauliui Lukui TAMOŠIŪNUI.**

Taip pat, kad šiose užduotyse būtų mažiau gramatinių klaidų pasistengė:

- **Laima SERVAITĖ;**
- **Ieva ŽUTAUTAITĖ.**

1 uždutis – Kompleksiniai junginiai bei nenormalus titravimas...

Nieko nėra tobulo – netgi 2 plius 2 kartais nelygu 4...

Inkognito

Periodinės elementų lentelės 3-12 grupių metalai gali sudaryti kompleksinius junginius.

1. Kokie junginiai vadinami kompleksiniais?

Labai dažnai susidarantys kompleksiniai junginiai yra tirpūs, taigi nuosėdų išnykimas yra vienas iš kompleksacijos reakcijų požymių. Mokykloje yra demonstruojamas bandymas: $\text{Ag}_2\text{O}_{(k)}$ ištirpinamas užpilant NH_3 (susidaro $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ kompleksinis jonas).

2. Kaip vadinamas $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ ir kam jis naudojamas?

Kompleksiniai junginiai turi dar keletą įdomių savybių. Kompleksinis jonas, turinti didelį centrinio atomo krūvį, stipriai padidina tirpalo rūgštingumą (lyginant su grynu vandeniu), pvz.: pateiktas kobalto kompleksas su vandeniu reaguoja kaip silpna rūgštis, atiduodama protoną tirpalui.



$$K_a = \frac{[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{OH})]^{2+}][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{H}_2\text{O})]^{3+}} = 2.04 \cdot 10^{-6} \quad (2)$$

3. Parašykite $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{H}_2\text{O})]^{3+}$ ir $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{OH})]^{2+}$ chloridų, $\text{K}_3[\text{Co}(\text{OH})_6]$ pavadinimus.

Kadangi K_a reikšmė yra daug didesnė nei K_w (10^{-14}), tirpalas stipriai parūgštėja (palyginimui, acto rūgšties $K_a = 1.8 \cdot 10^{-5}$).

0.10L 0.010M $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{H}_2\text{O})][\text{NO}_3]_3$ buvo titruota 0.10 M NaOH tirpalu.

4. Parašykite titruojant vykstančios reakcijos sutrumpintą joninę lygtį. (Toliau tekste ši lygtis bus vadinama (3))

5. Apskaičiuokite titravimui reikalingo nurodytos koncentracijos NaOH tirpalo tūrį.

Ketvirtoje uždutyje parašytos lygties (3) pusiausvyros konstanta gali būti apskaičiuota naudojant K_a iš (2) reakcijos bei vandens autojonizacijos pusiausvyros konstantos.

6. Apskaičiuokite (3) lygties pusiausvyros konstantą.
7. Raskite pradinį $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{H}_2\text{O})][\text{NO}_3]_3$ tirpalo pH.
8. Apskaičiuokite titruojamo tirpalo pH, kai $[[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{H}_2\text{O})]^{3+}] = [[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{OH})]^{2+}]$
9. Apskaičiuokite titruojamo tirpalo pH pasibaigus titravimui.

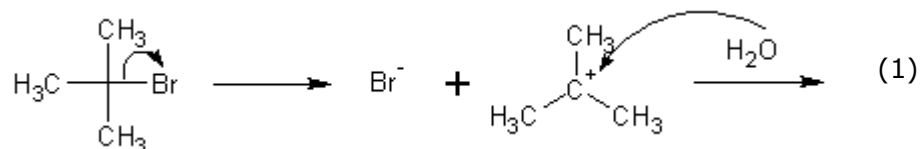
2 uždutis – Nukleofilinio pakeitimo reakcijos

Niekas to elektrono net nėra matęs,
bet stumdo tai visur, kur tik gali.

Inkognito

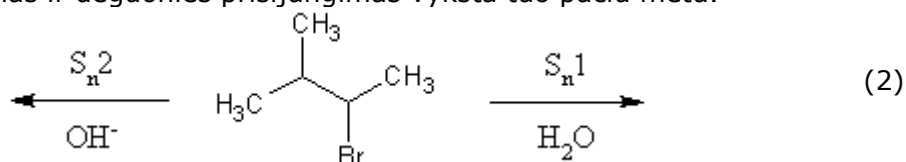
Daugumą organinių reakcijų apima sąveika tarp tuščių ir užimtų elektronų orbitalių, skirtingų krūvių dalelių arba tiesiog dėl elektronų tarpusavio stūmos. Kokios reakcijos bevyktų tarp organinių molekulių, visose jose elektronai juda iš vienos vietos į kitą. Šie dalelių judėjimo dėsningumai vadinami reakcijų mechanizmais. Vaizduojant mechanizmus, vieno elektrono judėjimą sutarta žymėti rodykle su vienu snapeliu, o elektronų poros - rodykle su dviem snapeliais.

Paprasto mechanizmo pavyzdys vykstant nukleofilinio pakeitimo S_N1 reakcijai:

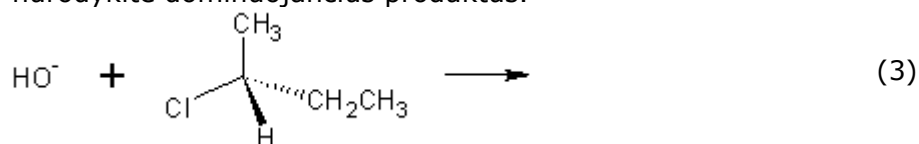


1. Pavaizduokite galutinį (1) reakcijos produktą.
2. Išrikiuokite šiuos reagentus pagal reakingumą (nuo mažiausio iki didžiausio) jiems dalyvaujant S_N1 reakcijoje: CH_3Br , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$, $(\text{CH}_3)_3\text{CBr}$, $(\text{CH}_3)_2\text{CHBr}$.

Kitas labai panašus mechanizmas vadinamas S_N2 . Jis nuo pirmojo skiriasi tuo, kad halogeno atskilimas ir deguonies prisijungimas vyksta tuo pačiu metu.



3. Pavaizduokite (2) reakcijoje susidariusius produktus.
4. Nustatykite (2) reakcijoje susidariusiuose produktuose esančių chiralinių anglies atomų absoliučias konfigūracijas naudodami R/S nomenklatūrą.
5. Parašykite bent du faktorius, nuo kurių priklauso, ar reakcija vyks pagal S_N1 , ar pagal S_N2 mechanizmą.
6. Nubraižykite laisvosios energijos priklausomybės nuo reakcijos eigos diagramas (grafikus), vykstant S_N1 ir S_N2 reakcijoms.
7. Pavaizduokite (3) reakcijos mechanizmus jai vykstant pagal S_N1 ir S_N2 sąlygas, nurodykite dominuojančius produktus.



3 uždutis – Šiek tiek apie aminorūgštis ir dar ateivius

Ech... Vėl tie žemiečiai!

Inkognito

Susipažinkite su aminorūgštimis.

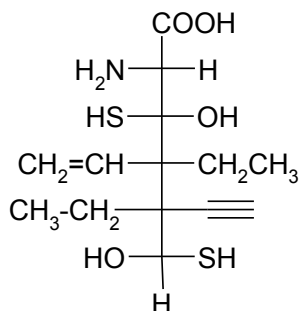
1. Kurios iš standartinių aminorūgščių turi du chiralinius centrus? Kuri neturi nei vieno? Pavaizduokite jų struktūras, pažymėkite chiralinius centrus.

Turite baltymo aminorūgščių seką:

**LASLETQSEE QMGAMGQRIQ ALKSLTLKMG DEIRGTNQT I DQLGDSFHNT TVKLRRTFGN
MMEARRSGI SINSWLIIFV MGVLEFFVWV IT**

Žinote, kad transmembraninė sritis (baltymo dalis, kuri yra ląstelės membranoje), susideda iš 17 iš eilės einančių aminorūgščių.

2. Nustatykite aminorūgščių seką, kuri sudaro transmembraninę sritį. Pagrįskite savo atsakymą.
3. Nustatykite šios aminorūgšties chiralinių centrų konfigūracijas (R ar S).



Kai paprasti dalykai atrodo paprasti, galima griebtis sunkesnių užduočių. Per slaptą misiją į Žemę buvo atgabentas ateivis. Viena tyrimų dalis atiteko mokslininkams iš slapto Lietuvos instituto. Toliau pateikti jų slapti rezultatai apie slapto ateivio slapto virškinamojo trakto slaptą dalį.

Endotelio ląstelės, kurios iškloja ateivio virškinamojo trakto b dalį, įsiurbia aminorūgštis (ATEIVIS1(A1) ir ATEIVIS2(A2)) vienvalečio metalo jono (X^+) pagalba. Vyksta g transportas į ląstelę, kurioje X^+ elektrocheminis gradientas per plazminę membraną padeda pernešti aminorūgštis prieš jų koncentracijų gradientus. Virškinamojo trakto b dalyje, kai temperatūra 45 °C, pH (endotelio ląstelių) = 8. Membranos potencialas yra -68 mV (neigiamas viduje).

$$[X^+]_{\text{viduje}} = 2,00 \text{ mM} \quad [X^+]_{\text{išorėje}} = 21,0 \text{ mM}$$

Izoelektrinis taškas $pI_{A1} = 8$, o A2 krūvis, kai pH = 8, yra -1.

Toliau pateikti likę tyrimų duomenys:

$$\begin{array}{ll}
 [A1]_{\text{viduje}} = 20,0 \text{ mM} & [A1]_{\text{išorėje}} = 0,17 \text{ mM} \\
 [A2]_{\text{viduje}} = 37,0 \text{ mM} & [A2]_{\text{išorėje}} = 0,25 \text{ mM}
 \end{array}$$

- Paaiškinkite, kas yra aminorūgšties izoelektrinis taškas?
- Apskaičiuokite ΔG 1 mol X^+ jonų perėjimui į endotelio ląstelę.
- Apskaičiuokite ΔG 1 mol A1 perėjimui į endotelio ląstelę. Kiek X^+ jonų turi būti transportuota kartu su viena A1 molekule?
- Apskaičiuokite ΔG 1 mol A2 perėjimui į endotelio ląstelę. Kiek X^+ jonų turi būti transportuota kartu su vienu moliu A2 molekulių?

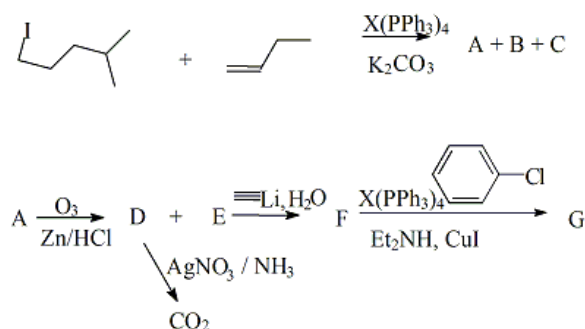
4 uždutis – Incidentas laboratorijoje

Šukės neša laimę, bet
tik ne laboratorijoje.

Inkognito

Vienas mokslininkas laboratorijoje vykdė reakciją: $XBr_2 + Q \rightarrow Y + Z$. Tačiau jis buvo nepatyręs mokslininkas ir trumpam išeidamas iš laboratorijos užkliudė indelį su distiliuotu vandeniu. Taigi, prasidėjus reakcijai, pamažu į reakcijos mišinį ėmė lašėti vanduo. Reakcijos pradžioje inde buvo 0.5 L skysčio, o XBr_2 koncentracija jame 1 mol/L, vanduo į indą lašėjo 0.5 mL/s greičiu. Mokslininkui grįžus, inde jau buvo 1 L skysčio. Reakcija $XBr_2 + Q \rightarrow Y + Z$ yra pirmojo laipsnio. Jos kinetinė lygtis: $v = k[XBr_2]$. Per tą laiką, kol mokslininkas buvo išėjęs, sureagavo 84.14 g XBr_2 . Reakcijos greičio konstanta 0.001 s^{-1} .

Toliau mokslininkas panaudodamas metalo X katalizatorius vykdė tokias reakcijas.



Metalo X kompleksiniai junginiai yra gana svarbūs katalizatoriai organinėje chemijoje.

- Nustatykite metalą X.
- Nustatykite junginius A-G. Žinoma, kad A, B ir C reaguoja su ozonu, taip pat pilnai suhidrinti junginį G, reikia 5 mol vandenilio, o junginys F skirtingose reakcijose gali elgtis ir kaip bazė, ir kaip rūgštis.
- Parašykite reakcijos, kai susidaro junginiai A, B ir C, mechanizmą. Kodėl gali susidaryti trys junginiai?
- 1-jod-4-metil-pentano reakcijos su butenu paskutinėje stadijoje iš beta padėties atskyla vandenilis. Ar gali vandenilis atskilti nuo kitų C atomų? Jei taip, duokite pavyzdžių.

5 uždutis – Rotacinė spektroskopija

- Kaip išmatuoti molekulę!?

- Gal su liniuote... :)

Inkognito

Rotacinė spektroskopija – tai vienas iš tiksliausių metodų nustatyti nedidelių molekulių geometriją. Spektroskopija pagrįsta elektromagnetinės spinduliuotės gebėjimu įtakoti polinių molekulių sukimąsi apie savo ašis, t.y. rotaciją. Mikropasaulio procesams, tarp jų ir rotacijai, aprašyti netinka įprasti klasikinės fizikos dėsniai, todėl naudojama kvantinė mechanika.

Paprasčiausia yra aprašyti tiesinių molekulių rotaciją, naudojant standaus rotoriaus modelį. Pagal kvantinės mechanikos dėsnius tiesinės molekulės rotacinė būseną yra apibūdinama dviem kvantiniais skaičiais J ir M_J . J – rotacinis kvantinis skaičius, charakterizuojantis molekulės sukimosi greitį. Jo galimos reikšmės yra visi neneigiami sveikieji skaičiai ($J=0,1,2,3,\dots$). M_J – pagalbinis rotacinis kvantinis skaičius, charakterizuojantis sukimosi kryptį ir sukimosi ašies orientaciją erdvėje; galimos reikšmės yra sveikieji skaičiai, priklausantys uždaram intervalui nuo $-J$ iki J ($M_J=-J,-J+1,\dots,0,\dots,J-1,J$).

Tiesinės molekulės rotacinė energija lygi $E_J=hcBJ(J+1)$, kur B – rotacinė konstanta, o J – rotacinis kvantinis skaičius (atkreipkite dėmesį, kad energija nepriklauso nuo rotacinio kvantinio skaičiaus). Rotacinė konstanta gali būti randama taip $hcB=\frac{\hbar^2}{2I}$, kur I – tai molekulės inercijos momentas, c – šviesos greitis vakuume, o \hbar – redukuota Planko konstanta, lygi $\hbar=\frac{h}{2\pi}$. Diatominės molekulės inercijos momentas lygus $I=\mu R^2$, kur μ – diatominės molekulės redukuotoji masė, o R – diatominės molekulės ryšio ilgis. Diatominės molekulės redukuota masė išreiškiama taip $\frac{1}{\mu}=\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}$, kur m_1 ir m_2 – diatominės molekulės atomų masės.

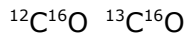
Rotaciniai spektrai gali būti registruojami tik molekulėms, turinčioms pastovų dipolio momentą. Spektrai susideda iš tam tikro bangos ilgio elektromagnetinės spinduliuotės absorbcijos arba emisijos linijų, kurios atitinka perėjimus iš vienos rotacinės būsenos į kitą. Yra leistini tik tie perėjimai, kurie tenkina atrankos taisykles: $\Delta J=\pm 1$ ir $\Delta M_J=0,\pm 1$. Spektuose linijų padėtys dažniausiai išreiškiamos bangos skaičiais, t.y. atvirkštiniais bangos ilgiais, išreikštais cm^{-1}

$$\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}$$

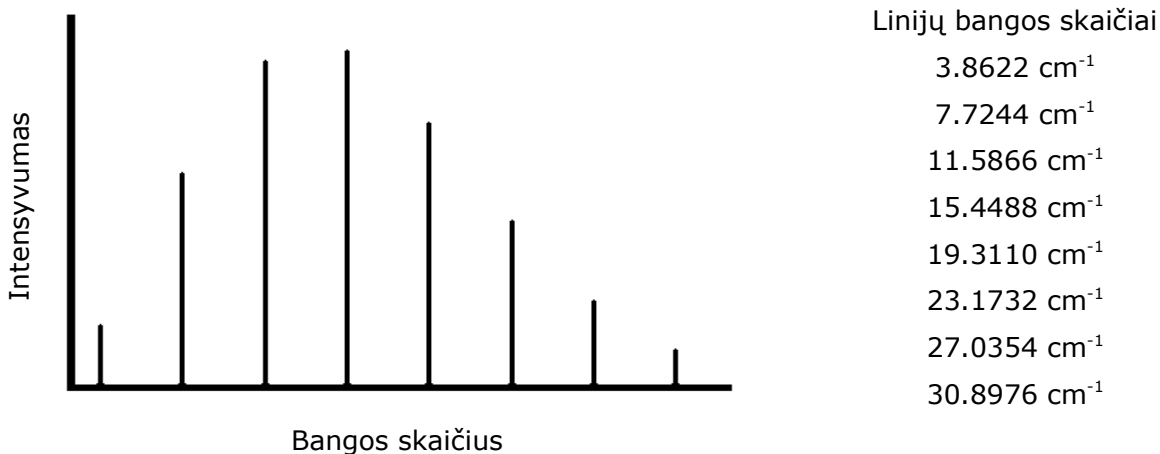
1. Nustatykite, kurių iš duotų molekulių rotaciniai spektrai gali būti stebimi. Kodėl?

H_2 O_3 CO CO_2 CH_4

2. Turime tiesinę molekulę, esančią rotaciniame lygmenyje $J=3$. Kiek yra rotacinių būsenų, esančių lygmenyje $J=3$ ir turinčių tokią pat energiją? Paašškinkite.
3. Diatominė molekulė, absorbavusi elektromagnetinės spinduliuotės kvantą, perėjo iš rotacinio lygmens J į lygmenį $J+1$. Po to, absorbavusi dar vieną tokį pat kvantą, perėjo į lygmenį $J+2$. Kam lygus energijų skirtumas tarp dviejų spektrinių linijų, jeigu molekulės rotacinė konstanta lygi B ?
4. Apskaičiuokite duotų molekulių redukuotas mases.



5. Apačioje pateiktas $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ rotacinis spektras. Iš spektro nustatykite molekulės rotacinę konstantą.

 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ rotacinis spektras


6. Iš spektro apskaičiuokite $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ryšio ilgį.
7. Kadangi $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ ir $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ cheminės savybės beveik tokios pat, tai ir ryšio ilgis yra beveik toks pat. Paaiškinkite, kuo $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ rotacinis spektras skirsis nuo aukščiau pateikto $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ spektro, jeigu abu spektrai buvo užregistruoti tokiomis pat sąlygomis.
8. Koks elektromagnetinės spinduliuotės tipas (radijo bangos, mikro bangos, infraraudonoji spinduliuotė, regimoji šviesa...) naudojamas registruojant rotacinius spektrus.

6 užduotis – α -spiralės ir β -klostės

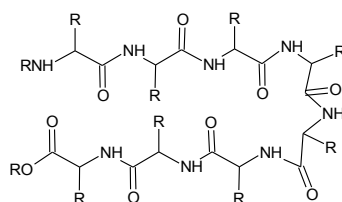
Šviesa tunelio gale vis artėja...

Nesumokėjau sąskaitos už internetą.

Inkognito

Pagrindiniai baltymo antrinės struktūros elementai yra α -spiralės, β -klostės, β -linkiai.

1. Kas yra baltymo pirminė, tretinė, ketvirtinė struktūros? Kokie ryšiai jas palaiko?
2. Kaip galima nustatyti kiekvieną struktūrą? (parašykite po vieną būdą)



Čia pavaizduota β -linkio struktūra. Linkiai yra jungiamasis spiralių ir klosčių elementas, jie pakeičia aminorūgščių kryptį 180° ir leidžia glaudžiau susipakuoti sferiniams baltymams.

3. Kiek aminorūgščių yra šiame linkyje? Pavadinkite ryšį, kuriuo jos susijungusios. Pavaizduokite jį ir jo rezonansinę struktūrą.
4. Kiek iš viso vandenilinių ryšių gali būti pavaizduotoje struktūroje?
5. Kokios dvi aminorūgštys dažniausiai lemia linkio susiformavimą?

Panašiu principu nupieškite dirbtinių β -linkių struktūras, kurias sudaro aminorūgščių sekos:

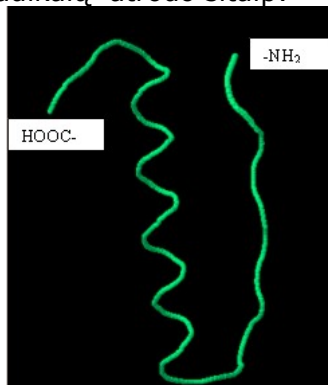
- a) Ser-Ala-Lys-Pro-Pro-Ala-Lys-Gly-Lys
- b) Ser-Trp-Ser-Trp-Glu-Asn-Gly-Lys-Trp-Thr-Trp-Lys

6. Kokios aminorūgštys dažniausiai būna linkio išorėje? Kodėl?
7. Kokia šių išorinių aminorūgščių reikšmė?
8. Kodėl susidaro a) linkis?
9. Kodėl susidaro b) linkis?
10. Palyginkite a) ir b) linkių susilankstymo ir išsilankstymo greičius.

Vieną natūralų hormoną sudaro 36 aminorūgštys:



Pagrindinės grandinės reljefas be radikalų atrodo šitaip:



Tarp grandinės, einančios nuo NH_2 galo, ir α -spiralinės egzistuoja aromatinės – alifatinės – hidrofobinės sąveikos, palaikančios tretinę baltymo struktūrą.

- c) Schematiškai pavaizduokite erdvinį aminorūgščių išsidėstymą: aminorūgščių, dalyvaujančių baltymo fragmentų surišime, radikalus nupieškite, o kitas aminorūgštis pažymėkite raidėmis.

Žinoma, jog: α -spiralinė prasideda Val14, baigiasi Val30. Eksperimentiškai nustatyta, kad svarbiausių sąveiką sudarančių aminorūgščių yra 9. Nekreipkite daug dėmesio į gretimų aminorūgščių trans išsidėstymą ir spiralinės vandenilinius ryšius. Atsižvelkite į erdvinis ir sąveikos faktorius.

11. Gauti kristalai, kuriuose Zn^{2+} jonas koordinaciniais ryšiais sujungia Gly1 ir His34. Pavaizduokite, su kuriais atomais rišasi Zn^{2+} .

7 uždutis – Atomas

Atomas toks mažas, kad net savo dydžiu prilygsta visatai.

Inkognito

Atomų pasaulis iš pirmo žvilgsnio gali pasirodyti paslaptingas ir sudėtingas. Pagrindinė šito priežastis – atomams negalioja įprasti klasikinės fizikos dėsniai. Cheminiu požiūriu atome svarbiausi yra elektronai. Kiekvienas elektronas atome turi savo „vietą“, t.y. orbitalę.

Atominės orbitalės gaunamos sprendžiant Šriodingerio (Schrödinger) lygtį $\hat{H}\psi = E\psi$, kur ψ – banginė funkcija, t.y. orbitalės matematinė išraiška, E – konkrečios orbitalės energija ir \hat{H} – Hamiltono (Hamilton) operatorius.

Aprašant atominės orbitales patogiau naudoti sferinę koordinatų sistemą, kurioje kiekvienas erdvės taškas apibūdinamas atstumu r iki koordinatų pradžios taško ir dviem kampais θ ir ϕ , parodančiais erdvinę orientaciją.

Lengviausiai Šriodingerio lygtis išsprendžiama vandenilio atomo tipo dalelėms, t.y. dalelėms, sudarytoms iš branduolio ir vieno elektrono (H, He⁺, Li²⁺, ...). Šriodingerio lygtis vandenilio

atomo tipo dalelėms $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi = E\psi$, kur \hbar – redukuota Planko konstanta

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, \quad \mu - \text{redukuota masė } \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_n} + \frac{1}{m_e} \quad (m_n - \text{branduolio masė, } m_e - \text{elektrono masė}),$$

$$\nabla^2 - \text{Laplaso (Laplace) operatorius } \nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2},$$

Z – branduolio atominis numeris, e – elementarusis krūvis, ϵ_0 – vakuumo elektrinė konstanta ir r – atstumas tarp branduolio ir elektrono.

Išsprendę Šriodingerio lygtį vandenilio atomo tipo dalelėms, gauname, kad konkreti banginė funkcija ψ_{nlm_l} gali būti apibūdinama trimis kvantiniais skaičiais, o pati funkcija susideda iš dviejų dalių $\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \phi)$. $R_{nl}(r)$ – radialinė dalis, aprašanti orbitalės dydį, o $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$ – sferinė harmonika, aprašanti orbitalės formą ir orientaciją erdvėje.

Radialinė dalis išreiškiama $R_{nl}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2Z}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) e^{-\frac{\rho}{2}}$, kur $\rho = \frac{2Z}{na}r$, a – Boro

(Bohr) radiusas $a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$ ir $L_{n+l}^{2l+1}(r)$ – asocijuotas Lagiero (Laguerre) polinomas. Asocijuoti

Lagiero polinomai apibrėžiami taip $L_k^j(\rho) = (-1)^j \frac{k!}{(k-j)!} \rho^{-j} e^\rho \frac{d^{k-j}}{d\rho^{k-j}}(\rho^k e^{-\rho})$, keli pirmi nariai

lygūs $L_1^1(\rho) = -1$, $L_2^1(\rho) = 2\rho - 4$, $L_3^1(\rho) = -6$, $L_3^0(\rho) = -3\rho^2 + 18\rho - 18$, $L_4^3(\rho) = 24\rho - 96$,
 $L_5^5(\rho) = -120$, ...

Sferinė harmonika dar susideda iš dviejų dalių $Y_{lm} = \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi)$, kur $\Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\phi}$,
 $\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta)$, $P_l^{|m|}(\cos\theta)$ - asocijuotas Ležandro (Legendre) polinomas.

Asocijuoti Ležandro polinamai apibrėžiami taip $P_k^j(\zeta) = \frac{1}{2^k k!} (1-\zeta^2)^{\frac{j}{2}} \frac{d^{k+j}}{d\zeta^{k+j}} (\zeta^2-1)^k$, keli pirmi nariai lygūs $P_0^0(\cos\theta) = 1$, $P_1^0(\cos\theta) = \cos\theta$, $P_1^1(\cos\theta) = \sqrt{1-\cos^2\theta}$, $P_2^0(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1)$, $P_2^1(\cos\theta) = 3\sqrt{1-\cos^2\theta}\cos\theta$, $P_2^2(\cos\theta) = 3(1-\cos^2\theta)$, ...

1. Užrašykite šių radialinių dalių funkcijas $R_{10}(r)$, $R_{20}(r)$ ir $R_{30}(r)$.
2. Užrašykite šių sferinių harmonikų formules $Y_{00}(\theta, \phi)$ ir $Y_{10}(\theta, \phi)$.
3. Užrašykite šių banginių funkcijų formules $\psi_{100}(r, \theta, \psi)$, $\psi_{200}(r, \theta, \psi)$ ir $\psi_{300}(r, \theta, \psi)$.

Pati banginė funkcija fizikinės prasmės neturi, bet banginės funkcijos modulio kvadratas $|\psi^2|$ yra lygus tikimybei, rasti elektroną konkrečiame taške. Tam tikruose atomo taškuose tikimybė rasti elektroną lygi nuliui, tokie taškai sudaro mazginius paviršius.

4. Raskite ličio jono Li^{2+} ir helio jono He^+ 2s orbitales atitinkančių banginių funkcijų mazginius paviršius. Nustatykite jų formas ir atstumus iki branduolių.

Kitas, nesunkiai iš banginės funkcijos „ištraukiamas“, fizikinis dydis yra radialinis paskirstymas

$P(r) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\phi = R_{nl}^2(r) r^2$, kuris parodo, kokia elektrono krūvio dalis yra susitelkusi tam tikru atstumu nuo branduolio. Atstumas nuo branduolio, atitinkantis maksimalią elektrono krūvio sancaupą, gali būti įsivaizduojamas kaip „klasikinės elektrono orbitos“ spindulys. Tuo tarpu orbitalė yra uždaras paviršius, talpinantis 95% elektrono krūvio.

5. Apskaičiuokite vandenilio elektrono, „skriejančio“ ψ_{100} banginėje funkcijoje, „klasikinės orbitos“ spindulį.
6. ψ_{100} banginė funkcija turi sferinę simetriją, todėl 1s orbitalė – sfera, talpinanti 95% elektrono krūvio. Apskaičiuokite vandenilio atomo 1s orbitalės spindulį. (Pastaba: tikslus analitinis sprendimas reikalauja matematinių žinių, kurios nepateikiamos mokykliniame matematikos kurse, todėl galima naudoti apytikslius sprendimo metodus.)
7. Kokio dydžio būtų vandenilio atomo 1s orbitalė, jeigu vietoj 95% elektrono krūvio talpintų 100%.

8 uždutis – Sidabrinis veidrodis

*Įdomu, kodėl fruktozė
saldesnė už gliukozę?!*

Inkognito

Mokyklos laboratorijoje įvykusi reakcija nustebino moksleivius. Sumaišius gliukozę ir dar vieną tirpalą, po kurio laiko mišinys neberodė sidabrinio veidrodžio reakcijos. Norint išsiaiškinti šio reiškinio priežastis, nutarta ištirti vykstančios reakcijos kinetiką.

Bandymams paimti 6 mėgintuvėliai su skirtingos koncentracijos gliukozė (0, 10, 15, 25, 47, 77 ir 100 mM) sumaišyti su neaiškioju tirpalu ir 10-ąją sekundę matuota jos koncentracija.

Į pagalbą pakviesti draugai matematikai nustatė, kad nuo 0 s iki 10 s reakciją aprašo tokia lygtis $-\frac{dc}{c} = 0.175 dt$. Imant didesnės nei 100 mM koncentracijos tirpalą reakcija apibūdinama lygybe $\frac{dc}{dt} = 0$, kur t žymi laiką sekundėmis, c gliukozės koncentraciją. Ištirta, kad integravimo konstanta antroje lygtyje lygi 3.10.

1. Kokio laipsnio reakcija vyko?
2. Koks buvo reakcijos greitis po 16 s?
3. Kokį maksimalų reakcijos greitį galėjo išmatuoti moksleiviai?
4. Kokiems svarbiems junginiams dalyvaujant būdingas toks reakcijos greičio kitimas?
5. Ar naudojantis surinktais duomenimis galima nubraižyti reakcijos greičio priklausomybę nuo gliukozės koncentracijos? Jei taip, nubraižykite ją. Jei ne, išsamiai paaiškinkite, kokius dar parametus turėjo nustatyti moksleiviai ir kodėl.
6. Dviem skirtingais būdais apskaičiuokite šios reakcijos Michaelio konstantą.

9 uždutis – Naudingumo koeficientas

Genialu tai, kas paprasta!

Inkognito

Įrodykite, kad maksimalus variklio naudingumo koeficientas yra $\eta_{max} = 1 - \frac{T_{šilt.}}{T_{šalt.}}$, kur $T_{šilt.}$ yra šilumos šaltinio temperatūra (K), o $T_{šalt.}$ – šaldytuvo. Pritaikykite šią formulę alternatyvioms temperatūros skalėms.

10 uždutis – Paslėpta konstanta

Nieko nėra neįmanomo!

Tikrai nieko...

Inkognito

Fotokolorimetru 1 cm ilgio kiuvetėje buvo tiriama reakcijos $A + B \rightarrow 2 C$ eiga. Nustatyta, jog reakcijos mišinio optinis tankis laike kinta taip:

$$A(t) = 0.2 + (6e^{0.025t} - 4)^{-1}$$

Junginio A ekstinkcijos koeficientas yra $0.7 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$, C – $0.1 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$. Junginys B šviesos nesugeria. Diferencialinė greičio išraiška šiai reakcijai yra

$$v = k[A][B]$$

1. Nustatykite reakcijos greičio konstantą k , jei pradinės koncentracijos $[A]_0 = 1.0 \text{ M}$ ir $[B]_0 = 1.5 \text{ M}$.
2. Koks optinis tankis ilgainiui nusistovės?

Pasinaudokite internetu:

http://www.uni-regensburg.de/Fakultaeten/nat_Fak_IV/Organische_Chemie/Didaktik/Keusch/kinetics.htm

Pabaiga :)
